**Термодинамическое описание систем фенилбензоаты – растворители**

***Краснопёров А.И., Пестов С.М.***

*Аспирант, 3 год обучения*

*Российский технологический университет МИРЭА, Москва, Россия*

*E-mail: krasnopyorov13@bk.ru*

Фенилбензоаты используются в качестве материала для различных оптоэлектронных приборов. Для расширения области практического применения необходима информация о межмолекулярном взаимодействии компонентов как в смесях, так и в системах жидкий кристалл (ЖК) – немезоген (например, растворитель, добавка).

Фенилбензоаты (R1-C6H4-COO-C6H4-R2): Н-70, R1 = OC6H13, R2 = OC4H9, Н-73, R1 = OC6H13, R2 = OC7H15, Н-93, R1 = OC4H9, R2 = OC6H13 - были выбраны в качестве модельных ЖК. Были получены политермы растворимости в растворителях разных классов. В таблице 1 представлены результаты для Н-70 (Δпл.Ho = 35.0 кДж/моль), Н-73 (Δпл.Ho = 29.3 кДж/моль), Н-93 (Δпл.Ho = 28.5 кДж/моль) в виде уравнения (1).

 (1)

где a = ΔрH/R, где x1 – мольная доля ЖК в насыщенном растворе при температуре Т [K], R – газовая постоянная, ΔрH – энтальпия растворения.

Таблица 1. Энтальпии растворения ЖК

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| ЖК | Растворитель | a | b | ΔрHo, кДж·моль–1 |
| Н-70 | метанол | –7734.50 | 19.1770 | 64.3 ± 1.0 |
| Н-70 | пропанол-1 | –6750.30 | 17.1470 | 56.1 ± 1.1 |
| Н-70 | пропанол-2 | –6102.40 | 14.7340 | 50.7 ± 1.0 |
| Н-70 | 1,4-диоксан | –4576.80 | 13.3260 | 38.1 ± 0.5 |
| Н-73 | метанол | –6136.80 | 13.6110 | 51.0 ± 1.0 |
| Н-73 | пропанол-1 | –3162.30 | 5.1573 | 26.3 ± 0.7 |
| Н-73 | пропанол-2 | –4873.50 | 11.3950 | 40.5 ± 0.5 |
| Н-73 | 1,4-диоксан | –5806.20 | 17.6910 | 48.3 ± 0.7 |
| Н-73 | н-гептан | –9309.80 | 27.5210 | 77.4 ± 1.2 |
| Н-73 | циклогексан | –10324.00 | 31.9460 | 85.8 ± 0.9 |
| Н-93 | пропанол-2 | –11216.00 | 31.0420 | 93.2 ± 1.6 |
| Н-93 | толуол | –1564.30 | 2.8439 | 13.0 ± 0.4 |
| Н-93 | ацетон | –5104.20 | 13.2470 | 42.5 ± 0.9 |
| Н-93 | циклогексан | –4184.70 | 9.1059 | 34.8 ± 1.2 |

Поскольку в большинстве систем ΔрHo > Δпл.Ho, в них наблюдаются положительные отклонения от модели идеального раствора, и можно использовать для их описания модель регулярных растворов.

Для выбранных мезогенов была рассчитана растворимость с использованием параметров растворимости Гильдебранда [1] и Хансена [2]. В зависимости от схемы расчёта значения δ ЖК лежат в диапазоне 18.3 ÷ 19.7 МПа0.5. Проведён сравнительный анализ расчётных методов и было выяснено, что для Н-70 и Н-73 лучшим из рассмотренных растворителей для очистки оказался 1,4-диоксан, а для Н-93 – толуол.

**Литература**

1. Hildebrand J., Scott R. L. Regular solutions / Prentice-Hall. Englewood Cliffs, New Jersey, 1962. 200 p.

2. Hansen C. M. The three-dimensional solubility parameter—key to paint component affinities // J. Paint Technol. 1967. Vol. 39. P. 104.